

## Моделирование вращательной динамики ДНК с учетом потенциала Морзе

Балашова Валентина Николаевна

Бакирский государственный университет

Закирьянов Фарит Кабирович, к.ф.-м.н.

[felizija2010@mail.ru](mailto:felizija2010@mail.ru)

При моделировании функциональных движений ДНК наиболее эффективным оказался поиск подходящего механического аналога, то есть хорошо изученной в механике модельной системы с аналогичным набором структурных элементов, движений и взаимодействий.

Разработано множество различных моделей, описывающих движения ДНК: континуальные и дискретные, спиральные, и игнорирующие спиральную структуру, имитирующие движение каждого или почти каждого атома фрагмента, и имитирующие движения только основных субъединиц, однородные модели, и модели, учитывающие наличие последовательности оснований. Наиболее оптимально структуру и движения ДНК передают мезоскопические модели. Существует два наиболее обширных класса таких моделей: поперечные и угловые [1].

Поперечные модели прекрасно зарекомендовали себя для описания процессов денатурации молекулы ДНК. Параметры этих моделей получили надёжное экспериментальное обоснование и хорошо известны. В то же время именно угловые модели более адекватно описывают конформационные изменения в процессе функционирования ДНК. Вместе с тем, экспериментальное определение параметров моделей этой группы затруднено. В данной работе мы предлагаем объединить два подхода – совместить «геометрию» угловых моделей с хорошо изученным потенциалом Морзе, описывающим динамику поперечных моделей.

$$I_k \ddot{\theta}_k = \theta'' - 2a^2 Dr_1 \varepsilon(-(r_0 + r_1 + r_2) \sin \theta_2 - r_2 \sin 2\theta_2), \text{ где } k = 1, 2 \quad (1)$$

Здесь  $I_k$  – момент инерции  $k$ -го основания,  $\theta_k$  – угол поворота  $k$ -го основания вокруг сахара-фосфатного остова в первой и второй цепочках соответственно;  $r_k$  – расстояния от сахара-фосфатных цепочек до азотистого основания;  $a$  и  $r_0$  – расстояния между азотистыми основаниями внутри и между цепочками,  $D$  – параметр потенциала Морзе, определяемый экспериментально.

Это уравнение имеет солитонные решения, параметры которых (ширина, импульс и энергия) уже можно сравнить с экспериментальными результатами.

Проведя аналогию между уравнением (1) и модельным уравнением Y-модели [2], делаем вывод, что учет поперечной динамики молекулы ДНК приводит к изменению значения коэффициента  $V$  в уравнении Y-модели:

$$V = 2\mu^2 Dr_1 \varepsilon h \sin \theta_k.$$

Также нами были рассчитаны числовые значения физических характеристик кинков (таких как масса, размер, энергия активации и т.д.) и построены графики их профилей (рис.1) и траектории движения.

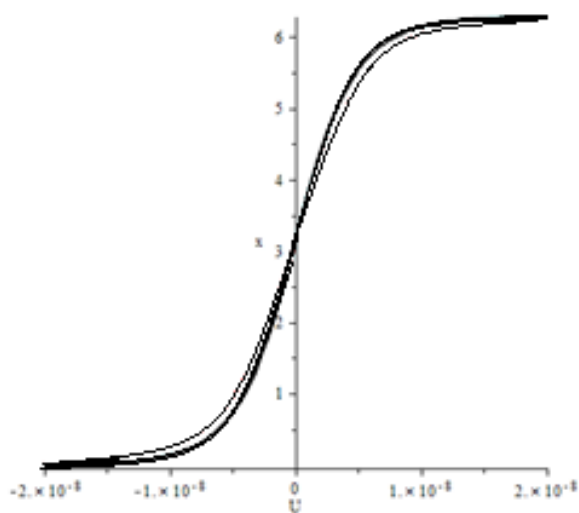


рис. 1. Солитонное решение MY-модели (жирная линия) по сравнению со стандартным решением Y-модели (тонкая линия).

Таким образом, можно сделать вывод, что комбинирование «геометрии» угловых и потенциала поперечных моделей позволяет сохранить качественное поведение моделей типа Y-модели и, в то же время, уточнить численные значения параметров и количественные характеристики получаемых решений.

Список публикаций:

[1] Якушевич Л.В. *Нелинейная физика ДНК* // М.: Ижевск: НИЦ «РХД». 2007. 252с.

[2] Якушевич Л.В., Балашова В.Н., Закирьянов Ф.К. *О движении кинка ДНК под действием постоянного торсионного момента* // Математическая биология и биоинформатика. – 2016. – Т. 11, №1. – С. 81-90.

## **Комплекс протонной терапии на базе синхроциклотрона СЦ-1000**

**Брожик Дарья Сергеевна**

*Кузора Наталья Александровна, Мамедова Наталья Игоревна, Пак Федор Александрович,*

*Халиков Александр Ифратович*

*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова*

*НИЦ «Курчатовский институт»*

*[daschunya-94@mail.ru](mailto:daschunya-94@mail.ru)*

Работа посвящена Комплексу протонной терапии (Комплекс) Петербургского института ядерной физики. Совместно с Российским научным центром радиологии и хирургических технологий им. ак. А.М. Гранова был разработан и внедрен метод облучения “напролет” на базе синхроциклотрона СЦ-1000. Метод основан на облучении внутричерепных мишеней горизонтальным пучком протонов с энергией 1000 МэВ в комбинации с подвижной техникой облучения [1,2]. Особенностью данной методики является возможность формирования пространственных распределений поглощенной дозы малого размера в мишени с высоким пространственным градиентом. Разработанный метод оказался эффективным как при лечении различных заболеваний головного мозга (аденома гипофиза, артериовенозные мальформации), так и при паллиативном облучении аденогипофиза при гормонозависимых формах рака.

Во время облучения пациент находится на установке для протонной стереотаксической терапии (УПСТ), состоящей из лечебного стола, прибора-фиксатора головы и рентгеновского центратора. Подвижная техника облучения осуществляется за счет вращения лечебного стола вокруг вертикальной оси и маятниковых движений прибора-фиксатора головы вокруг горизонтальной оси. Рентгеновский центратор используется для правильной укладки головы пациента [1,2].

В связи с износом некоторых частей оборудования, а также введением более жестких, в том числе и международных [3], требований для лучевой терапии в настоящее время проводится модернизация Комплекса для приведения к стандартам высокотехнологической медицинской помощи (ВМП) и дальнейшего возобновления лечения.

Особое внимание обращается на модернизацию частей УПСТ, в частности рентгеновского центратора. Организованное автоматизированное рабочее место врача позволило дистанционно задавать все необходимые параметры для правильной укладки пациента с помощью рентгена. Преимущества заключены в высоком качестве изображений, возможности обработки информации, и работы с результатами диагностических исследований пациента на КТ и МРТ.

Рассмотрены особенности разработанной программы управления установкой и контроля параметров протонного пучка, позволяющей точно выполнять позиционирование и отрабатывать динамическое перемещение составных частей Комплекса для исполнения планов облучения.

Одним из направлений модернизации является обновление системы клинической дозиметрии, которая занимается экспериментальным описанием распределений поглощенной дозы. Так как синхроциклотрон СЦ-1000 не является специализированной медицинской установкой, в отделении протонной терапии разработана собственная дозиметрическая система и методика привязки к дозе, основанная на измерении поглощенной дозы с помощью метода термолюминесцентной дозиметрии (ТЛД) и ионизационных камер и тканеэквивалентного фантома. Экспериментальные результаты тестирования новой системы клинической дозиметрии, а также верификация с имеющимся оборудованием при использовании твердотельного фантома и капсул с ТЛД на пучке протонов с энергией 1 ГэВ не превышает 5%, что рекомендовано международными стандартами.

Финальным этапом модернизации Комплекса является необходимость в разработке системы трехмерного планирования протонной лучевой терапии для выбора плана облучения с учетом рисков для здоровых тканей, в соответствии с международными стандартами [3]. Главными особенностями разрабатываемой системы планирования являются: реконструкция трехмерной модели тела пациента;